



TITLE:

# 研究会報告 第3回「振動子系の力学過程と統計」

AUTHOR(S):

---

CITATION:

研究会報告 第3回「振動子系の力学過程と統計」. 物性研究 1966, 6(2): A3-A16

ISSUE DATE:

1966-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/85880>

RIGHT:

## 研究会報告

### 第3回「振動子系の力学過程と統計」

#### § 1 前回までの経過とまえがき

去る11月22～26日の5日間、基研において上記の研究会が開催された。前身である「不完全結晶の格子振動」研究会の時代から通算すると、才6回にあたる。6回を通じて討論は一般に極めて遠慮のないものであつて、手に汗をにぎる場面もしばしばあり、それを土台にして毎年多くの新しい仕事が生まれた。前3回の成果はProgressのSupplement No. 23 "Lattice Vibration of Imperfect Crystals" となつてまとめられたほかに個々の論文となつて発表されており、後3回の成果もすでに印刷されたもののほかにやはりSupplement "Contribution to the Theory of Linear Chains" としてまとめられる予定である。

今回の研究会の最終日には、今までの経過をふり返つた上で今後の計画が討議されたが、基研の短期研究会の形での共同研究は一応今回で打ち切ることになつたので、この機会に才1回までさかのぼつて、まづ前回までの経過をまとめて報告したいと思う。但し筆者のとつたノート及び一部は記憶によつてまとめたので、思いちがいや脱落があるかもしれないことをあらかじめおことわりしておく。また研究会活動の全体としての推移に関しては、筆者の主観がかなり入ると思うが、これについては「歴史の叙述においてもつともよくないのは特定の見方をするとということではなく、見方が一貫していないことである。云々」という永原氏の言（中央公論12月号p.240）を引用して遁辞としたい。なお敬称を省略させていただく。

1957年頃から国内各地において極めて少数ながら不完全格子の研究が芽生えて来ていた（田中・山藤の不純物を含む格子の熱力学的性質の研究、武野の不完全格子のエネルギー状態密度の計算、福田・河原田の無秩序格子のスペクトルの研究、堀・朝日の伝達行列法の応用等）ので、この種の研究者が集まつて研究会を開くことができたなら有益であろうという旨の手紙を筆者が1960

## 研究会報告

年1月頃田中あて送った。たまたま田中は基研研究部員であり、また偶然それが部員会の開かれる直前であつたので、さつそくそれが提案され、同時に提出されていた「Band 理論の基礎と限界」研究会の一部という形でまとめられたのであつた。このようないささか偶然的にきつかけで始まつた研究会が多くの特徴的な研究者をひきつけながら活潑に6年間も続き、多数の成果を生み出すようになるとは当時は夢にも考えなかつた。

才1回研究会は同年6月基研において、各自の仕事とそれに開連した論文をくわしく紹介するという形式で行われた。スピーカーとテーマは次のようであつた。

武野：不規則格子のエネルギー状態密度

堀：不規則格子の振動スペクトル

福田：2元格子の振動

下地：不規則格子の物理化学的性質

山藤：Disordered Chain の誘電緩和スペクトル

豊沢：Impurity Conduction

黒沢：Impurity Band

寺本：格子力学

このほか久保、田中、富島が出席し、活潑な質疑応答があつた。上記のようにテーマがかなり分散しており、最初ということもあつて、excite した討論はなかつたが、各地で孤立して研究していた人達が顔を合わせて互の仕事を知り合つたことは非常に有意義であつた。

才2回目は寺本が世話人となり、独立した短期研究会として1961年6月に開催された。1回目の経験にもとづいて研究会の形態も整備され、次のような日程で行われた。

<p>Introductory Talk</p> <p>寺本 (格子振動の問題の review)</p> <p>1日目</p> <p>豊沢 (電子的な問題の review)</p>	<p>方法論の分析 (1次元)</p> <p>堀 (方法論の review)</p> <p>松田 (松田理論)</p>
--	---

方法論の分析 (3次元) 2日目 福田 (能率の方法) 武野 (摂動法)	方法論のつづき 松原 (Green 函数) 黒沢 (Impurity Band) 自由討論 purity Band
格子振動の Statistical-Dynamical な問題 3日目 戸田 (Rubin の論文紹介、discrete system の一般論)	同左 堀 (Time-dependent な問題) 自由討論
格子振動に対する赤外吸収の問題 4日目 問題 柏村 (U-center の実験)	同左 松原 (赤外吸収の理論)
5日目 ま と め	

1 回目に比べて論点が格段にはつきりして来たことがわかる。最終日の「まとめ」では、問題が Time-independent な問題 (スペクトルの問題)、Time-dependent な問題及び実験と密着した問題の 3 つに分類され、それぞれについて問題点の摘出が行われた。2 回目の特徴は time-dependent な問題ないし statistical な問題が前面に押し出されて来たところにあつた。スペクトルの問題に関しては、松田の理論が旧来の諸方法の枠からぬけ出し、のちに発展した phase theory の先駆となるものであつたが、あまりに先駆的でありすぎたためにこの時にはその意味が他のメンバーによく理解されなかつたのは残念であつた。

才 3 回研究会は 1962 年 6 月に札幌で開かれたが、上記の 2 回目の特徴が更に拡大され、time-dependent な問題をめぐつて異常に活潑な討論が行われた。とくに連続媒質対離散媒質の問題、Rubin の pole の意味、スペクトルの singularity 及び coarse-graining と time-dependent behavior との関係等に議論が集中し、これから Supplement No.23 の中のいくつ

## 研究会報告

かの論文が生れたばかりでなく、現在に至るまで振動子系グループの中心的テーマとなつてゐる重要な問題—不可逆過程と力学の問題、Brown 運動論の基礎、散乱理論とスペクトルの問題等—が摘出されるとともに、これを契機として既存の計算方法の盲目的な適用や常識的な数式の interpretation に対する批判的態度が explicit にグループの1つの基調になつて来たのであつた。以上に関するスピーカートテーマは

戸田：連続体と離散系の対応。次元数の問題

堀：スペクトルの singularity 及び coarse-graining と long-time behavior

武野：Perturbation 展開と short 及び long-time behavior

小暮：Rubin, Turner, Kashiwamura 及び Montroll-Potts の方法の応用

福田：Time-dependent problem の一般論

寺本：不可逆性と力学

広田：discrete space における field theory

であつた。

一方、スペクトルの問題も等閑に付されたわけではなく。小寺、寺本の局在振動と酔歩の問題との関係などの指摘、松田、朝日の伝達行列の方法の多次元への拡張などの重要な寄与があつた。前者は新しい数学的方法を物理の問題に導入すると同時に数学者を刺戟して確率過程論を発展させる素地となり、後者は伝達行列の方法に自信をもたせ、無秩序系のスペクトルをしらべる武器として積極的にこれを用いようという気運を作り出して、才1回研究会において筆者がDeanの計算結果を紹介して摂動法や能率法の無力さを示して以来 discouragement された気味になつていた無秩序系のスペクトルの研究を再び促進させるきっかけになつた。またこのほか実験に関してもかなりの紹介があつた。これらに関するスピーカーは

松田：Long-chain molecule と伝達行列

柏村：3次元格子の局在振動

小寺：酔歩の問題と局在振動

寺本：酔歩の理論とポテンシャル論の応用

朝日：伝達行列の方法の高次元への拡張

小暮：水晶の peculiar absorption, 中性子散乱と局在振動

寺本：三石氏の赤外吸収実験

戸谷：吸着と赤外吸収, electronic surface state

第4回目と第5回目、既ち第1回及び第2回の「振動子系の力学過程と統計」研究会はそれぞれ1963年10月に基研で、及び1964年7月に菅平で開かれた。これらについては物性研究誌上にくわしい報告がのつているので、概略をのべるのに止める。この2回の研究会においては、前回にほぼ固つた、可能な限り問題を厳密にとり扱つて、在来の近似理論を批判的に吟味し、より sound な basis を見出そうという方針にそつて、time-dependent な問題と independent な問題とが何れも着実に追求されたが、とくに後者が急速に発展したことが特徴的であつた。既ち松田によつて無秩序系のスペクトルに special frequency または energy (総称して special point) が存在することが見出され、松田及び堀によつてその証明が与えられたことと、堀・福島によつて peak structure の説明が与えられたことによつて、Dean の発見した微細構造の本質が明かにされた。またその副産物として Saxon-Hutner の定理が大巾に拡張されたことも大きな成果であつた。これらは伝達行列の方法の発展である連分数または phase の方法によるものであるが、別の方向への発展として伝達行列の鎖状分子の応用(岡田)、S 行列の方法の拡張(朝日、堀、福島、山寺、大沢)、定差方程式のスペクトル理論の確立(朝日)などの成果が得られた。

Time-dependent な問題においては、harmonic な系の energy flow と熱伝導との関係、random force や random field の問題、harmonic な系の定常状態への接近の問題が精力的に研究された(寺本、柏村、鯖田、中沢、滝沢、戸田、小寺、小暮)が、これに関連して非線形の問題が浮び上つて来たこともこの2回の特徴であつた(小野、斎藤)。非線形の問題は問題自体もまた方法も多岐にわたるため、統一的な立場を作ることが困難であり、この期間中にはいろいろな問題が指摘されたのみで大きな発展はみられなかつたが、第6回の研究会においてはかなりの見通しが得られ、今後振動子系グループの

## 研究会報告

1つの中心問題となつてゆくであろう。

実験に密着した諸問題に関しては、最初から一貫して実験事実の紹介や、理論の応用の結果が報告されて来たのであり、第4, 5回目においても、戸谷、小野によつてKohn effectや熱膨張の問題が話された。しかしながらこれらの問題に対しては、以上のべたような基礎的な問題ほどには多数のメンバーのエネルギーが集中されなかつたことは否定出来ない。一般的に言えば、このようなことは確かに望ましいことではなく、この研究会のもつていた問題点の一つであつて、これに関する強い反省の声も常にあつた。しかし一方ではこの研究会の特長は理論の基礎を深く追求するところにあつて、実験と密着した研究は他により適した場がある、とも考えられる。今までそのような場が少なかつたのは事実であるが、これはこの方面の実験が日本では著しくたちおくらせていることの反映であろう。最近ようやく振動子系グループの仕事が実験家からも注目されるようになり、実験家と協同の研究会も開かれるようになって来たのは喜ばしいことであり、この問題も自然に解決されてゆくことが期待される。

第6回の研究会においては問題をTime-independent, Time-dependent及びAnharmonicな問題の3つに大別し、それぞれにおよそ1日づつを割りあてて話題提供と討論が行われ、最終日に将来計画が討議された。以下は各sessionの座長のまとめたその報告である。ただし座長により原稿が預けなかつた分については編集者が補足した。ただし大部時日が経過しているので不十分の点があると思われるが、その点は何とぞ御容赦願いたい。(朝日・松田寺本)

### §2 Time-independent Problems

(22日午前) Phose Theory 堀淳一がdisordered latticeのスペクトルに関して全般的に解説を行い、その中で、堀を中心に解決してきた事柄、未解決の事柄について明かにした。

振動子系の問題に関して、その振動スペクトルがdisordered latticeの

場合、極めて特徴的なノコギリ状の固有振動密屏を示すことが、電子計算機を用いて示されたことは、非常にショッキングなことであつた。これは従来用いられていた近似的方法、例えば摂動法、モーメント法、あるいはグリーン関数法などが、全く特徴的なスペクトル構造を与えないで、その意味で正しくない結論に導く場合が大部分であることを示している。2原子核子は二つの固有振動のバンドを持つが、この原子の配列が無秩序になつたとき、このバンド構造はぼやけてならされると考えるのは、従来の近似法の結果であつたが、これがノコギリ型のシャープな多くのバンドに分れるというのが電子計算機による計算で示されたのだが、これが計算機というものの能力によつてみかけ上現れたものでないことを、松田・堀の理論は明白に示したのである。

堀の理論はいろいろの試みを含むが、一般的には phase theory がすぐれている。一次元の格子について考えると、振動は2階の差分方程式で与えられるが、これを二つの相隣る原子の変位からつくつた state vector  $(X_n^{(1)}, X_n^{(2)})$  を用い、鎖の一方からその変化を追いかけていくと

$$\begin{pmatrix} X_{n+1}^{(1)} \\ X_{n+1}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_n^{(1)} \\ X_n^{(2)} \end{pmatrix}$$

というマトリックスの形じ表現される。state vector の定義はいろいろ考えられ一義的ではないが、最も都合のよいものを選べばよい。(・)はこれに関連してきまるマトリックス (transfer matrix) である。二次元の square lattice でも同様な取扱いができる。

state ratio を  $X_n^{(1)} / X_n^{(2)}$  で定義し、この値を一次元の直線上に与え、これを単位円の上に移す Cayley 型の変換を考える。state ratio は一応実数と考えておくが、これは必要条件ではない。この単位円上での state ratio の位置を与える角  $\theta_n$  を phase と定義する。固有振動数の値 (あるいは自由電子のエネルギーの値) によつて上述の変換が (1) hyperbolic (2) elliptic, (3) parabolic の三つの場合に分けられる。この固有振動が実現される条件をしらべるとスペクトルに関する Saxon-Hutner の型の定理の拡張、松田氏の special frequency (スペクトル密度が0になるところ)



## 研究会報告

などの種々の結果がこのような、ややトポロジカルな方法によつて美事に示される。これは堀のすぐれた理論の特徴の一つである。

2次元格子の場合に specice frequency が起る条件も調べられるが、数値的には将来の問題である。

未解決の問題として、一つには liquid metal model ( $\delta$  関数的な一定の深さのポテンシャルが勝手な間隔でばらまかれている場合の自由電子の運動) をこの方法で調べると、電子計算機でやつた方が広いギャップがでていて、理論的に意味が弱いと考えられる average eigenvalue equation (方程式自身を disorder に対し平均した  $\langle T_{\text{FH}} = 2 \rangle$  による方法) がこの場合のギャップをよく与えるように見える。このことから average eigenvalue equation の意味について、考え直す必要があるように思われる。あるいは、もつと強い意味が見出されるのも知れない。(戸田、盛和)

(22日午後) 松田は Herzberg, Modinos が DNA 分子の Exciton band を議論するのに導入した coarse-grained spectrum の重要性を論じた。すなわち、われわれのランダム格子のスペクトルについて明確になつてきた微細構造の存在は、観測量あるいは観測の精度に応じて特徴的なある coarse-grained されたスペクトルの性質しか実さいの観測には反映しないと思われる。Herzberg Modinos の定義した coarse grained spectrum と、たとえば格子の配列のある統計的な特性量、すなわちその観測には配列のどの程度の情報が反映するかという量との間に対応がある号で松田はこの後者に対して Environment parameter なる量を導入して両者の対応を解析的に検討した。これらの新しい概念に関する定量性の点について激しい討論がなされたが、この試みは一つの重要なステップとして今後研究会の重要問題として発展していくことが期待される。

福島は一次元で nearest neighbor interaction のモデルでは surface mode が存在しないが、second neighbor interaction を入れたモデルでこの問題を調べるという試みを紹介した。second neighbor を入れた階差 operator は四階の微分方程式に対応するが、これの固有値問題に対する解析は二階と異つて、いくつかの質的な困難な問題があることがわかつた。それらは分散曲線の異常性に関係しており戸谷はこれに関連しており戸

谷はこれに関連して金属の場合の実験事実を紹介した。また寺本は高分子特にヘリックスの全体としての運動の規準振動がやはり高階の階差方程式で特長づけられることをコメントしヘリックスのアコーディオン振動、ねじれ振動、蠕動振動の解析の重要性を例を挙げて示した。(寺本)

(23日午前)には広田がrandomなpotential  $V(\mathbf{r}) = \sum V(\mathbf{r}-\mathbf{r}^{(i)})$  ( $\mathbf{r}^{(i)}$ の値がrandom)のある場での一電子波動函数 $\psi(\mathbf{r})$ も平面波 $\psi_0(\mathbf{r})$ より出発して積分方程式

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{\psi\pi} \frac{e^{ik_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

を解くことにより求める試みを述べた。しかしまだ十分よい見通しは得られておらず更に $\psi(\mathbf{r})$ を求める意義とかその境界条件などについて疑問が持たれた。(松田)

次いで、朝日に依つてlinear chainに於けるnearest neighbor interactionのHamiltonianから導れる  $\text{Differmoe } E_q$ についてそのDifference operatorのspectral decompositionが話題とされた。Titchmarshに依る2nd orderのDifferential  $E_q$ の議論と全く同様にして、seal boundary conditions, Wronskian,  $L^2$  spaceの概念が幾分のmodificationと共に用いられる結果として固有函数系に依る展開定理が得られている。多くの点でTitchmarshによるDifferential  $E_q$ との類似は完璧であるが、散乱問題へ通じる一つのreformulationの有効性が示されている。

幾つかの簡単な具体例が示されているが、半無限系でのsurface modesとreal boundary conditionとの関係、及び両無限系が相異なる2つの半無限系で結ばれて作られた時の話などが新しいものである。特に後者については、そのspectroemとscattering formulationとの間に注目すべき内容がある様に思われる。(朝田)

## 研究会報告

### §3 Time dependent problem

先ず中沢によつて Rubin の model についての再検討が行われた。格子振動子系に於いて Brownian motion に似た振舞をなすものとして重い孤立した粒子の運動はよく知られている。併しその Random force の部分については幾つかの問題が残されていたので、従つて又 Systematic motion にも疑問点が在つた。中沢は此れら両者の相関に焦点を絞つて議論を展開し、より一層望ましい形に運動方程式を作り上げた。例へば、その systematic motion は Rubin のそれとは異つていて単なる pole approximation ではないし、更には又 Mori によるものよりも一層平均化が進んだものである。

次いで寺本によつて寺本と成田による Rubin model の一般化、即ち隣接する二粒子を取り上げてその Brownian motion が議論された。

i) symmetric mode が示す振舞は Rubin による一粒子のそれと本質的に同等なものである。

ii) antisymmetric mode が示す振舞は全く新しいもので、現象論に云う oscillating damping type の systematic motion に対応する。

以上二点について、pole approximation の範囲で色々の特徴が述べられた。Left hand cut が及ぼすであろう Random force の部分への影響故に又 systematic motion についての再検討が望まれる。(朝日)

桜井 : 格子振動子系の中にある重い粒子の運動が Brown 運動に似た挙動をするという Rubin の計算を、森のブラウン運動の一般論から見直した。Langevin 方程式におけるゆらぎの力の相関や、まさつ係数との関係が一次元の場合について explicit に求められる。2 又は 3 次元では Rubin の結果は 1 次元と異つている。これらについてはまだしらべられていないが、どのようになるだろうか。(斎藤信彦)

木暮は昨年発表した格子とガス相互作用の解析のその後の発展について述べた。

## §4 Anharmonicity

(10月25日午前)

鯖田 : 非線形振動子系についての最近の研究を紹介した。Fermi, Pasta, Ulam が3次の非線形のポテンシャルで結ばれた振動子系に対して行つた数値計算によると、振動子間にエネルギーの交換がほとんど行われずエルゴード性のないことがわかつた。これに対してFord, Jacksonらはエネルギーの交換がおこるためには、振動子の固有振動数 $\omega_k$ の間に共鳴条件

$$\sum_k n_k \omega_k = 0$$

があることが必要で、FPUの計算例ではこの条件がないことによるものであることを指摘した。ここで $n_k$ は整数である。またFord, Jacksonらは非線形振動論に対する摂動法によつて共鳴条件のないときには、それらの間にエネルギー交換が十分に行われなことを示し、計算機を用いた計算でも確めた。エネルギー以外の運動の定数の問題やWhittakerのいうadelphic integralにも関係し、エルゴード性の立場から興味のあることがらである。

(11月25日午後)

25日午後はひきつづきanharmonic な問題の討論にあてられ、まづ戸田が

1 Harmonicな系においては、系の代表点の運動を円の上の運動に変換することが出来るが、anharmonic な場合にはこれが出来ないのと扱いがむずかしい。

2 しかしanharmonic な場合にもある種の対称性をもつnormal-mode-like な定常運動が存在し得る。

3 運動方程式を

$$m \ddot{u}_n = -f(x_n - x_{n-1}) + f(x_{n+1} - x_n)$$

とかいたとき、函数 $f(x)$ の逆函数 $x(f)$ が一意になる存在ならば、これを形式的に簡単な形

## 研究会報告

$$\frac{d}{dt} x(p_n) = -(2p_n - p_{n-1} - p_{n+1})$$

に変換することが出来る (dual transformation)。

### 4 運動方程式が

$$m\ddot{u}_n = K(u_{n-1} + u_{n+1})g(u_n) - 2ku_n$$

の形をしている場合には、代表点の運動を (I) のように描像することが出来る。

例えば  $g(u) \equiv B^2 / (B^2 - a^2 u^2)$  ときには

$$u_n = A \frac{\sin}{\cos}(\omega t) S_n(mk + \delta, k)$$

となる。

ことを remark した。これらの事実は非常に興味あるものであるが、これらを如何にして有効に anharmonic system の研究に利用するかは今後の問題である。

次に斎藤が方程式

$$m\ddot{x}_n = -k(x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}) + \lambda \left[ f(x_{n+1} - x_n) - f(x_n - x_{n-1}) \right]$$

によつて支配される一次元の anharmonic chain の  $k$  番目の粒子に  $t=0$  から一定の力  $F$  を加えたときの系の運動を電子計算機で追跡した結果を報告した。各粒子のエネルギーの時間平均及び隣接粒子間の相関を粒子数 8,  $\lambda=0.02/4$ ,  $F=0.02$  の場合に対して求めた結果、平均エネルギーも相関もともに期待される平衡値に接近せず、しかも漸近値が粒子の位置によつて異なるという結果が得られた。これが粒子数や計算の精度の不足に原因するものか、それとも実際に平衡値に近づかないのかは未だ不明であつて、これをはつきりさせるためには大巾に計算の精度をあげる必要がある。

村瀬は 3 次の anharmonicity を入れた場合の 3 次元格子の熱伝導を Green 関数を用いて計算した。Definite な結論には達していないが、少なくとも今のような diagram の集め方をする限りでは normal process から有限の

conductivity が出るように見える。これは Peierls の結論と矛盾するが、このことが diagram の集め方によるものかどうか等、こまかい点はなお検討を要する。計算の方法はこの方法によつて不可逆過程と力学との関係を明らかにすることにあるが、その目的のためには方法論自身にまず問題があるようにも思われる。この点に関して若干の議論があつた。小野はこれに関連して、伝導の問題に関しては 1 次元系と 3 次元系の間に本質的な相違があり、heat flow に対する寺本等の計算結果は 1 次元に特有のものであろうということを注意した（前回報告の「非線形の問題II」を参照）。これに対して 3 次の anharmonicity のみを考えることがよいかどうか、random chain ではどうなるか等の議論があつた。（堀）

## §5 自由討論と将来計画

### 自由討論

この時間は雑談的に二人の話が出ました。まず最初は柏村の「一次元格子での力学解への固定端の影響」という題の話です。一次元格子の線型方程式の力学解をラプラス変換した形で求めておいて逆変換する訳ですが、境界条件として  $N$  個の有限格子を固定端条件で解いた解と、無限格子の力学解との差（これが端の影響と呼ばれるもの）は大体次の形に書けます。

$$\Delta \phi(l, m; t) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{z^{-N}}{1 - z^{-2N}} e^{\frac{\omega_0 t}{z}} (z - z^{-1}) \frac{dz}{z}$$

ただし  $|l|, |m| < \frac{N}{2}$ ,  $c$  は単位より大きい円筒です。この量を計算して柏村は  $\omega_0 t \leq \frac{N}{2}$  ならば  $\Delta \phi = O(e^{-N})$  になることを示したのに対して、二三の人から発言があり、(1)  $\Delta \phi$  を小さく見積る為に  $t$  への制限が厳しくなりすぎている。又この制限は十分条件であつてもつとゆるい時間制限に対しても  $\Delta \phi$  はそんなに大きくはならないだろう。(2) 元来  $\Delta \phi$  に対しては波の群速度で  $N$  を割つた時間が問題となる筈なのに、最高位相速度  $\omega_0$  が効いているのは計算がまずい為であろうことが指摘されました。

次に松田は「一次元の random system では wave function は localize している」という Mott-Twose (Adv. in Phys. 10 (1961), 109) の記述

## 研究会報告

に対する否定的見解を述べました。それは coarse-grained spectrum を求める時と同じ方法でグリーン関数  $G_{nn}(E+i\Gamma)$  の  $\Gamma$  を正として有限系で問題を設定し、randomness を系の粒子数を無限大にもつて行く過程で導入し、そこで求めた  $\lim G_{nn}(E+i\Gamma)$  が  $\Gamma \rightarrow 0$  の操作に対して収束するか否かを調べて、これが発散する時は系のエネルギー・スペクトラムは band を作っているという事を示そうという訳です。松田は Huökel 近似で Hamiltonian を構成した場合にこの  $G_{nn}(E+i\Gamma)$  を連分数の方法で求め、場合によつてはこれから求めたエネルギー・スペクトルは band を作っていること即ち wave function は局在していないことを示しました。これに対してはその理論構成に対して、 $N \rightarrow \infty$  の極限操作に対する  $G$  の収束性が  $\Gamma$  に関して一様であるか否かが問題となることが朝日によつて指摘されましたが、それを別にすれば結論には皆が納得した様でした。(柏村)

## 将来計画

最後の日にこれまでのグループの研究経過を振り返り、将来計画についての討論が行われた。

先ず昨年の研究会のときにまとめたグループの研究の現状の位置づけ(物性研究 Vol 13, No 1, (1964) P42)にどのような変化があつたかについての討論がなされた。その結果 attack されつつあるが解決に到達しない問題として Time-independent problems としての surface vibration, impurity 間の相互作用の問題、disordered lattice における振巾の localization の問題が新たに加えられ、これから attack すべき未解決の問題として time-dependent と time-independent problems との関係が新たに指摘された。

しかしこれら未解決の問題をどのような形で attack すべきかについては問題の性質上余り議論はされなかつた。今後大いにやるべき問題として研究会終了後戸田よりコメントが寄せられたので以下に掲載する。(松田)

不純物を含む結晶格子に起り得る局在振動の問題。これは研究会のはじまる頃から理論的に予言され注目された問題で、このグループでいろいろの場合について広く、その存在が調べられた。ついで、ドイツ、日本でU センター（アルカリハライドの陰イオンを $H^-$  あるいは $D^-$  でおきかえたもの）の赤外線吸収により、これが確められた（この一部はこの前の supplement に掲載）物性研などの格子欠陥とも関連している。また、最近では中性子の非弾性散乱により合金中の局在振動がとらえられ、中性子線による研究の要求が高まりつつある現在、この方面の研究とも関連ができてきている。我々のグループの中では具体的な結晶の場合に対する計算はあまり重視しない人も多いようであるが、実用的方面からの要求により3次元の実際の結晶に対する計算もどこかでやるように考えなければならないだろう。

不下逆理象・ブラウン運動。Rubin の与えた結果は、現在でも基本的な意味を持つている。平衡への近接ということは、その周囲あるいは、それ自身が thermostat としての役割を常に recover することでもある。この意味で thermostat の動的性質を考える問題が更に将来に残された。このことは研究会のときにうまく表現されなかつたが、thermostat はこのような意味で力学的に考察される必要がある。一体 thermostat はwhite spectrum をもたねばならないのか、その必要はないのか、どのようにresponseするものであればよいのか、など 問題である。問題にする系のスペクトルをある意味でカバーするスペクトルを持てばよいのであろう。系の場合々々によつて thermostat に対する要求されることは異なつていてもよい。

Special frequency , とそれに関係のある事項。近似方法がすべて間違つた結果を与える可能性が大いにあることを明白にした意義は強調しても、強調されすぎることはない程であると思う。具体的な場合に、これが、どのように系の特殊な性質として現われる可能性があるかという点がまだ考察されていない。一足飛びにDNAなど生体高分子の特殊性に結びつけるにはまだ足場が十分とはいえない。それにしても、この方面への展開は、どうしてもやりとげられなければならないし、大きい飛躍が期待されていると思う。（戸田）